

University of Groningen

Low energy noble gas ion reflection from monocrystalline surfaces. A calculational and experimental study upon the influence of thermal vibrations of the surface atoms.

Poelsema, Bene

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

1976

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Poelsema, B. (1976). *Low energy noble gas ion reflection from monocrystalline surfaces. A calculational and experimental study upon the influence of thermal vibrations of the surface atoms.* s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting

Het werk dat wordt beschreven in dit proefschrift, heeft betrekking op het verstrooien van laag energetische edelgas-ionen aan oppervlakken van éénkristallen. Het hoofdonderwerp is het bestuderen van de invloed van thermische vibraties van oppervlakte atomen op de eigenschappen van hoek- en energie-verdelingen van de gereflecteerde ionen. Door vergelijking van de experimentele resultaten met berekeningen, waarin bepaalde teststructuren zijn opgenomen, kan de gewenste informatie verkregen worden.

De rekenwijze en de fundamentele aannames worden besproken in hoofdstuk I. Vanwege de grote oppervlakte gevoeligheid van laag energetische edelgas-ionen verstrooiing is het voldoende alleen de buitenste laag in de beschouwing mee te nemen. We maken gebruik van het z.g. rijenverstrooiingsmodel, omdat het simuleren van verstrooiing aan de hele bovenste laag zou leiden tot onaanvaardbare konsekwenties voor de benodigde reken-tijd. De invloed van thermische vibraties op de vorm van de hoekverdelingen en de energiespektra blijkt onder bepaalde omstandigheden zeer groot te zijn.

Hoofdstuk II handelt over een nauwgezet onderzoek naar de invloed van verschillende model parameters op de resultaten van de simulaties. Speciale aandacht is besteed aan het variëren van de interactie potentiaal, welke niet zo goed bekend is voor deze lage primaire energieën (4 - 10 keV). De berekeningen tonen aan, dat de resultaten gelijktijdig en duidelijk gevoelig zijn voor het variëren van de potentiaal en van de eigenschappen van de thermische vibraties van de oppervlakte atomen. Een uitzondering wordt gevormd door de temperatuur, waarboven de QT piek verschijnt. Deze QT piek ontstaat door verstrooiing aan putjes, gevormd door drie atomen, welke ontstaan t.g.v. thermische vibraties.

In hoofdstuk III worden de berekeningen kwalitatief vergeleken met de metingen. De simulaties beschrijven redelijk de experimenten voor verstrooiing over een (vaste) verstrooiingshoek van 30° . De afwijkingen, die optreden kunnen op een bevredigende wijze worden toegeschreven aan ladingsomwisselingen en

bij lagere tempera-
de ideale structuur

De volgende hoo-
vergelijking van d-
schijnen van de QT
trefplaatje, kan w-
uitwijkingen te be-
oppervlakte Debye-
de uitwijkingen te
gelijking van de in-
sultaten suggereert
wijkingen van nabu-

In hoofdstuk V w-
om de werkelijke po-
rekeningen aangepas-
variëren van de scr-
dering van de Thoma-
heden zijn de breed-
van de hoogtes van
bele (QD) botsingsp-
gen waarden voor de
de theoretische waar-

dit proefschrift, heeft laag energetische edelgas-
atomen. Het hoofdonderwerp
zijn thermische vibraties van
ionen van hoek- en energie-
ionen. Door vergelijking
berekeningen, waarin be-
rekeningen, kan de gewenste infor-

aannames worden besproken
oppervlakte gevoeligheid van
verstrooiing is het voldoende
verhouding mee te nemen. We
verstrooiingsmodel, omdat het
laagste bovenste laag zou lei-
den voor de benodigde reken-
ingen op de vorm van de
verstrooiing blijkt onder bepaalde

uitgezet onderzoek naar de
parameters op de resultaten
het is besteed aan het va-
riëren, welke niet zo goed bekend
zijn (4 - 10 keV). De bereke-
gelijktijdig en duidelijk
de potentiaal en van de
verhoudingen van de oppervlakte
verminderd door de temperatuur,
de QT piek ontstaat door
voor drie atomen, welke ont-

ellingen kwalitatief verge-
lijkt beschrijven redelijk de
verstrooiing (vaste) verstrooiings-
optredens kunnen op een bevre-
emde ladingsoverwisselingen en

bij lagere temperaturen aan verstoring t.g.v. afwijkingen van
de ideale structuur van het oppervlak.

De volgende hoofdstukken zijn gewijd aan een kwantitatieve
vergelijking van de berekeningen met de experimenten. Het ver-
schijnen van de QT piek boven bepaalde temperaturen van het
trefplaatje, kan worden benut om de grootte van de atomaire
uitwijkingen te bepalen. Het resultaat is uitgedrukt in een
oppervlakte Debye temperatuur, welke dient om de grootte van
de uitwijkingen te koppelen aan de temperatuurschaal. Een ver-
gelijking van de in hoofdstuk IV bepaalde waarde met LEED re-
sultaten suggereert het bestaan van correlaties tussen de uit-
wijkingen van nabuuratomen.

In hoofdstuk V worden verschillende mogelijkheden besproken
om de werkelijke potentiaal te schatten. Daartoe worden de be-
rekeningen aangepast aan verschillende grootheden, door het
variëren van de screening lengte in de gebruikte Molière bena-
dering van de Thomas-Fermi potentiaal. De aan te passen groot-
heden zijn de breedte van de hoekverdelingen, de verhouding
van de hoogtes van de kwasi-enkelvoudige (QS) en de kwasi-dub-
bele (QD) botsingspiek en de breedte van de QS piek. De verkre-
gen waarden voor de screening lengte zijn belangrijk lager dan
de theoretische waarden voor de verschillende ionen.

7081
1976